

ФІЗИКА, ХІМІЯ

УДК 546.1

РОЗРАХУНОК ВІДНОСНОГО ВМІСТУ КОМПОНЕНТ КАРБОНАТНОЇ ВОДНОЇ СИСТЕМИ

О. Лисанець

студент 2 курсу, група АТ_{інт}-21, навчально-наукового автодорожнього інституту

Науковий керівник – к.т.н., доцент В. Р. Гаєвський

*Національний університет водного господарства та природокористування,
м. Рівне, Україна*

Зроблений розрахунок відносного вмісту компонент карбонатної водної системи в залежності від pH розчину. Розрахунок виконаний на основі рівнянь дисоціації вуглекислоти по першій і другій ступеням, а також на основі рівняння дисоціації води і рівняння електронейтральності. Результати розрахунків представлені графічно.

Ключові слова: карбонатна водна система, рівняння дисоціації, рівняння електронейтральності, концентрація, активність.

Сделан расчет относительного содержания компонент карбонатной водной системы в зависимости от pH раствора. Расчет сделан на основании уравнений диссоциации углекислоты по первой и второй ступеням, а также на основании уравнений диссоциации воды и уравнений электронейтральности. Результаты расчетов представлены графически.

Ключевые слова: карбонатная водная система, уравнение диссоциации, уравнение электронейтральности, концентрация, активность.

Estimates of the relative content of carbonate component of the water system, depending on the pH of the solution. The calculation is made on the basis of the equations of dissociation of carbon dioxide for the first and second levels, as well as on the basis of the equation of dissociation of the water and the equations of electroneutrality. Calculation results are presented graphically.

Key words: carbon-water system equations dissociation, equations electroneutrality, concentration, activity.

Карбонатна водна система (КВС), яка формується шляхом змішування води з вуглекислим газом (вміст якого в атмосфері) є однією з найпоширеніших у природі водних систем і вивчалась багатьма дослідниками [1]. Оскільки КВС формується завжди, коли водне середовище є відкритим по відношенню до атмосфери то така система враховується практично у всіх технологічних процесах, які використовують такі відкриті водні системи ([2]) і завжди важливо знати вміст її компонентів чи їх співвідношення. В даній роботі пропонується розрахунок відносного вмісту компонент КВС на основі рівноважних співвідношень констант дисоціації вугільної кислоти по першій і другій ступеням, рівняння дисоціації води і рівняння електронейтральності. За допомогою розрахункової програми MathCad розраховано вміст кожної із компонент КВС і в графічній формі представлена залежність відносного (по відношенню до загального вмісту усіх компонент КВС вмісту кожного компонента КВС в залежності від pH системи.

Кількість компонентів КВС визначається реакцією взаємодії вугільної кислоти з водою:



з подальшою дисоціацією вугільної кислоти по першій та по другій ступеням



Оскільки при таких взаємодіях змінюється pH водної системи, необхідно враховувати реакцію дисоціації води



Із (1) – (4) слідує, що компонентами КВС є CO_2 , HCO_3^- , CO_3^{2-} та супроводжуючі компоненти H^+ і OH^- . Кількісні співвідношення між компонентами КВС за умов термодинамічної рівноваги встановлюються на підставі виразів для констант дисоціації вугільної кислоти по першій та другій ступеням (5), (6), константи дисоціації води (7) та рівняння електронейтральності (8)

$$K_1 = \frac{HCO_3^- \cdot H^+}{CO_2}, \quad (5)$$

$$K_2 = \frac{CO_3^{2-} \cdot H^+}{HCO_3^-}, \quad (6)$$

$$K_w = H^+ \cdot OH^-, \quad (7)$$

$$[H^+] = [HCO_3^-] + 2 \cdot [CO_3^{2-}] + [OH^-], \quad (8)$$

де K_1 , K_2 , K_w - константи дисоціації вугільної кислоти першої, другої ступеней та константа дисоціації води, відповідно. Компоненти в дужках відповідають їх концентраціям, без дужок – активності. В [1] представлені температурні залежності цих констант, які для $t = 25^\circ C$ становлять: $K_1 = 1.72 \cdot 10^{-4} M$, $K_2 = 4.40 \cdot 10^{-11} M$, $K_w = 1.00 \cdot 10^{-14} M$.

Розв'язуючи систему рівнянь (5) - (8) по відношенню до незалежного параметра H^+ вирази для концентрацій компонент карбонатної водної системи будуть такими:

$$[CO_2] = \frac{H^+}{K_1} \cdot \left[\frac{\frac{H^+}{\gamma_{H^+}} - \frac{K_w}{H^+ \cdot \gamma_{OH^-}}}{1 + \frac{K_2 \cdot \gamma_{HCO_3^-}}{H^+ \cdot \gamma_{CO_3^{2-}}}} \right], \quad (9)$$

$$[HCO_3^-] = \frac{\frac{H^+}{\gamma_{H^+}} - \frac{K_w}{H^+ \cdot \gamma_{OH^-}}}{1 + \frac{K_2 \cdot \gamma_{HCO_3^-}}{H^+ \cdot \gamma_{CO_3^{2-}}}}, \quad (10)$$

$$[CO_3^{2-}] = \frac{\frac{H^+}{\gamma_{H^+}} - \frac{K_w}{H^+ \cdot \gamma_{OH^-}}}{1 + \frac{H^+ \cdot \gamma_{CO_3^{2-}}}{K_2 \cdot \gamma_{HCO_3^-}}}, \quad (11)$$

де γ_x – коефіцієнти активностей компонентів x , розраховані за рівнянням Дебая-Хюккеля другого наближення [3].

Розрахунок відносного вмісту компонентів КВС $C(\%)$ розраховували за співвідношенням

$$C_i = \frac{[X_i]}{\sum_i [X_i]} \cdot 100\% \quad (12)$$

де $[X_i]$ – молярна концентрація i -ї компоненти.

На рисунку 1 показані криві, розраховані для кожного компонента за співвідношенням (12)

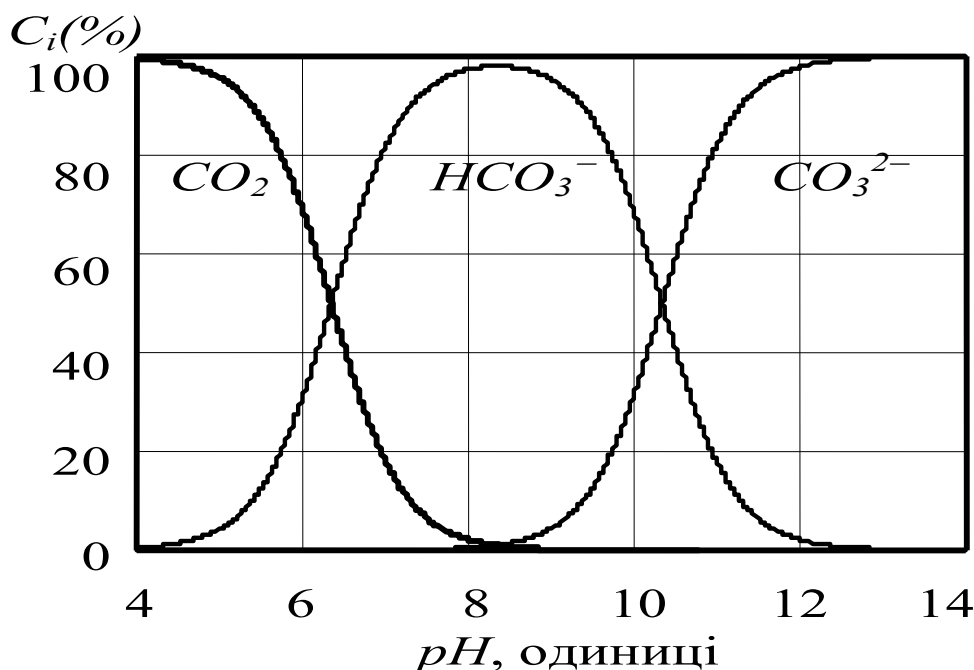


Рисунок. Відносний вміст CO_2 , HCO_3^- та CO_3^{2-} в залежності від pH

З рисунка 1 слідує, що:

- 1) в області $pH \approx 4$ компоненти КВС знаходяться у формі CO_2 ;
- 2) діапазоні $pH=4 \div 8.5$ компоненти КВС представлені у формі CO_2 і HCO_3^- , причому при $pH=6.34$ вміст цих компонент однаковий, а при $pH=8.35$ компоненти КВС знаходяться у формі HCO_3^- ;
- 3) в діапазоні $pH=8.5 \div 12$ компоненти КВС представлені у формі HCO_3^- і CO_3^{2-} , причому при $pH=10.33$ вміст цих компонент однаковий, а при pH більше 12 компоненти КВС знаходяться у формі CO_3^{2-} .

Список використаних джерел:

1. Заводнов С.С. Карбонатное и сульфидное равновесие в минеральных водах [Текст]/ С. С. Заводнов. - Л. : Гидрометеорологическое издательство, 1965,. - 119 с. 2. Кульський Л.А., Технология очистки природных вод [Текст]/ Л.А. Кульський, П.П. Строкач. – К: Вища школа, 1981, - 328 с. 3. Дамаскин Б.Б., Электрохимия [Текст]/ Б.Б. Дамаскин, О.А. Петрий. – М. Высшая школа, 1987, - 295 с.